

4 Fitten nichtlinearer Modelle mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate am Beispiel eines Fallversuchs

Lernziele Lektion 4

- Sie können nichtlineare Modelle mit einem oder zwei Parametern mit Hilfe der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an gemessene Daten fitten und daraus die Modellparameter, sowie ihre Unsicherheiten abschätzen.
- Sie kennen die Annahmen und Voraussetzungen, die der Methode der kleinsten Fehlerquadrate zu Grunde liegen.
- Sie können ihre Fitprozedur auf Konsistenz prüfen, indem Sie die Residuen des Fits kontrollieren.
- Sie sind in der Lage mit Hilfe der Residuen eventuelle systematische Fehler zu identifizieren.

4.1 Das physikalische Modell des Experiments

Hintergrundinformation I. Wir betrachten die Messung der Flugzeit einer Stahlkugel, die im freien Fall eine Strecke z durchmisst. Die Messung wird mit Hilfe der Apparatur in Abb. 15 durchgeführt. Das Ergebnis des Experiments sind N Datenpunkte (z_j, t_j) .

Die Physik des Experiments wird durch die Gleichung

$$z_j = \frac{1}{2}gt_j^2$$

beschrieben. Das Ziel des Experiments ist die Bestimmung der Erdbeschleunigung g aus dem gemessenen Datensatz, der in Abb. 16 in doppellogarithmischer Darstellung gezeigt ist. Die doppellogarithmische Darstellung wurde gewählt, weil in dieser Darstellung die Messpunkte auf einer Geraden liegen sollten.

Modell M. Wir nehmen zunächst an, dass die z_j exakt bekannt sind. Im Gegensatz dazu sei die Zeitmessung mit einem statistischen Fehler behaftet, für den wir das additive Fehlermodell

$$t_j = \sqrt{\frac{2z_j}{g}} + \epsilon_j := h(z_j, g) + \epsilon_j$$

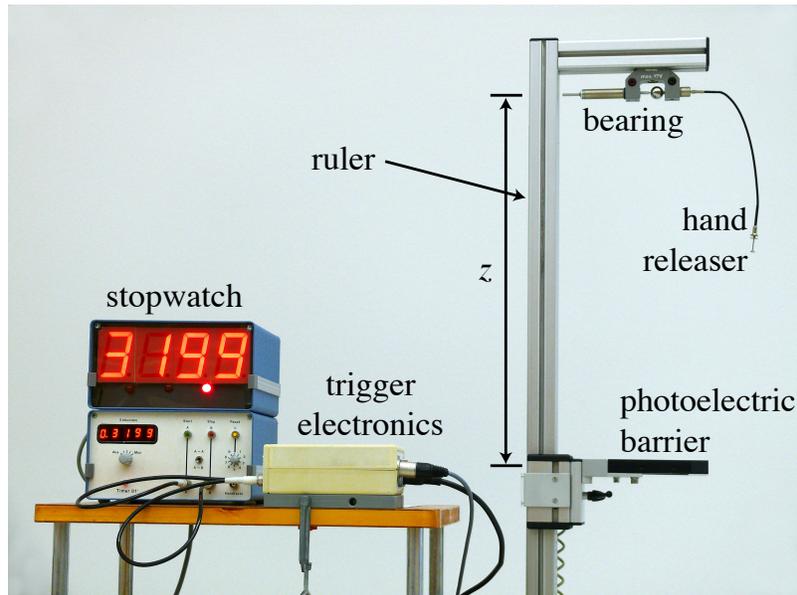


Abbildung 15: Versuchsaufbau des Fallversuchs.

annehmen. Desweiteren nehmen wir an, dass die ϵ_j normalverteilt sind, d.h.,

$$\text{pdf}(\epsilon_j | \sigma^2, M, I) = \mathcal{N}(\epsilon_j; 0, \sigma),$$

und dass σ^2 für alle Datenpunkte gleich ist. Dieser Parameter beschreibt die Genauigkeit der Stopuhr, die wir *a priori* nicht kennen. Wie bereits bei der linearen Regression nehmen wir auch hier wieder an, dass die statistischen Abweichungen ϵ_j statistisch unabhängig sind. Aus all diesen Annahmen ergibt sich die Likelihood

$$\text{pdf}(\{t_j\} | \{z_j\}, g, \sigma^2, M, I) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{N/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \chi^2(g, \sigma^2) \right]$$

mit

$$\chi^2(g, \sigma^2) = \frac{N}{\sigma^2} \times \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N [t_j - h(z_j, g)]^2}_{Q(g)}.$$

Die Grösse $Q(g)$ heisst mittlerer quadratischer Fehler, oft auch als MSE (mean square error) abgekürzt.

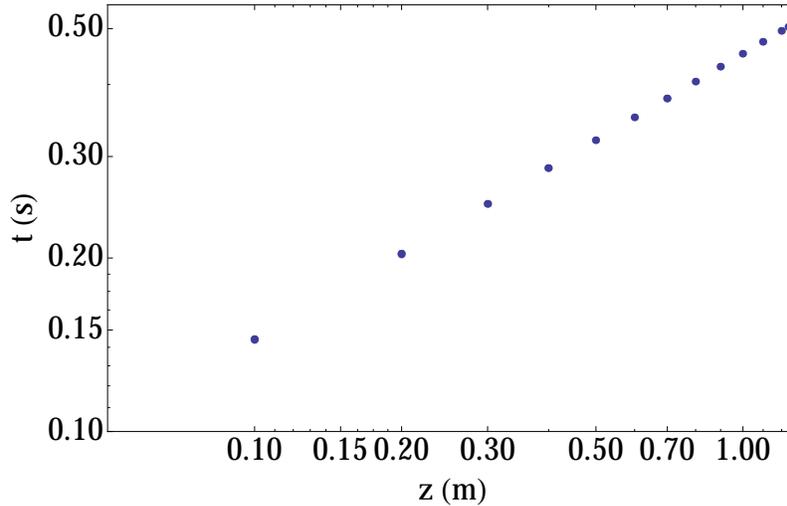


Abbildung 16: Messdaten des Experiments zum freien Fall. Die Daten bestehen aus $N = 31$ Messpunkten, die nicht alle sichtbar sind, weil sie zum Teil übereinander liegen.

4.2 Abschätzung der Erdbeschleunigung g und der Streuung σ^2

Priorwahrscheinlichkeit. Für die Priorwahrscheinlichkeit benutzen wir wie bisher das Indifferenzprinzip, definieren analog zur linearen Regression $\tau := 1/\sigma^2$ und setzen

$$\text{pdf}(g, \tau | M, I) = \begin{cases} \text{const.} & \text{für } g > 0, \tau > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Posteriorwahrscheinlichkeit. Im Prinzip gewinnen wir die Posteriorwahrscheinlichkeit mit Hilfe des Bayes'schen Theorems. Wir ersparen uns jedoch die exakte Berechnung und verwenden lediglich die Proportionalität

$$\text{pdf}(g, \tau | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) \propto \tau^{N/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \chi^2(g, \tau) \right] = \tau^{N/2} \exp \left[-\frac{N\tau}{2} Q(g) \right].$$

Das Verhalten der Verteilung wird ganz wesentlich von $Q(g)$ bestimmt. Diese Funktion ist in Abb. 17 gezeigt.

Abschätzung der Parameter. Wir interessieren uns für das Maximum der Posteriorverteilung, das mit dem Minimum von $Q(g)$ zu tun haben muss. Zu diesem Zweck betrachten

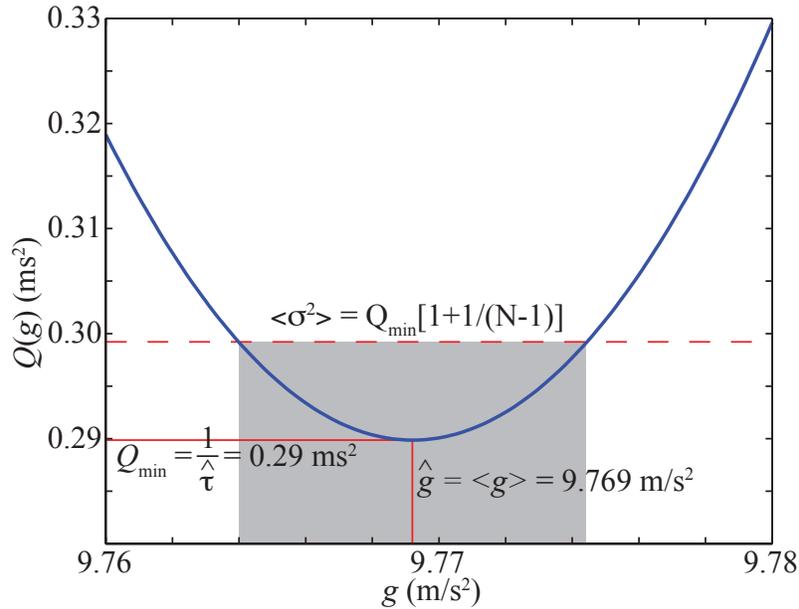


Abbildung 17: Der mittlere quadratische Fehler $Q(g)$ als Funktion des Parameters g . Die Zahl der Datenpunkte ist $N = 31$.

wir vorteilhaft den Logarithmus der Posteriorverteilung

$$\ln \text{pdf}(g, \tau | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \text{const.} + \frac{N}{2} \ln \tau - \frac{N\tau}{2} Q(g) =: f(g, \tau).$$

Das Maximum der Posteriorverteilung bei $(\hat{g}, \hat{\tau})$ wird auch zu einem Maximum von $f(g, \tau)$ an der selben Stelle führen. Wir finden dieses Maximum durch simultanes Lösen von

$$\left. \frac{\partial f(g, \tau)}{\partial g} \right|_{\hat{g}, \hat{\tau}} = 0 \quad \text{und} \quad \left. \frac{\partial f(g, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\hat{g}, \hat{\tau}} = 0.$$

Wir finden,

$$\left. \frac{\partial f(g, \tau)}{\partial g} \right|_{\hat{g}, \hat{\tau}} = 0 \Rightarrow \left. \frac{dQ(g)}{dg} \right|_{\hat{g}} = 0,$$

d.h. \hat{g} minimiert den mittleren quadratischen Fehler. Die Grösse $Q_{\min} = Q(\hat{g})$ wird oft auch mit LMSE (least mean square error) abgekürzt. Die Methode, einen Schätzwert für den oder die Parameter eines Modells durch Minimieren des mittleren quadratischen Fehlers zu ermitteln, nennt man Methode der kleinsten Fehlerquadrate (oder auf Englisch: ‘method of least mean squares’).

Darüber hinaus finden wir

$$\left. \frac{\partial f(g, \tau)}{\partial \tau} \right|_{\hat{g}, \hat{\tau}} = \frac{N}{2\tau} + \frac{NQ(\hat{g})}{2} = 0 \Rightarrow \frac{1}{\hat{\tau}} = Q(\hat{g}) =: Q_{\min}.$$

Wir betrachten die Werte \hat{g} und $\hat{\sigma}^2$ als Schätzwerte für g und σ^2 , weil sie die Posteriorverteilung maximieren. Eine solche Abschätzung bezeichnet man als *maximum a posteriori estimate*. Gleichzeitig ist in unserem Fall die Posteriorverteilung proportional zur Likelihood, so dass wir die Abschätzung auch als *maximum likelihood estimate* bezeichnen können. Das Abschätzen von g aus dem Minimum von $Q(g)$ nennt man Methode der kleinsten Fehlerquadrate oder auch *method of least mean squares*. Diese Minimierung wird meist numerisch mit dem Computer durchgeführt. Das Ergebnis für den Datensatz aus Abb. 16 ist in Abb. 18 gezeigt.

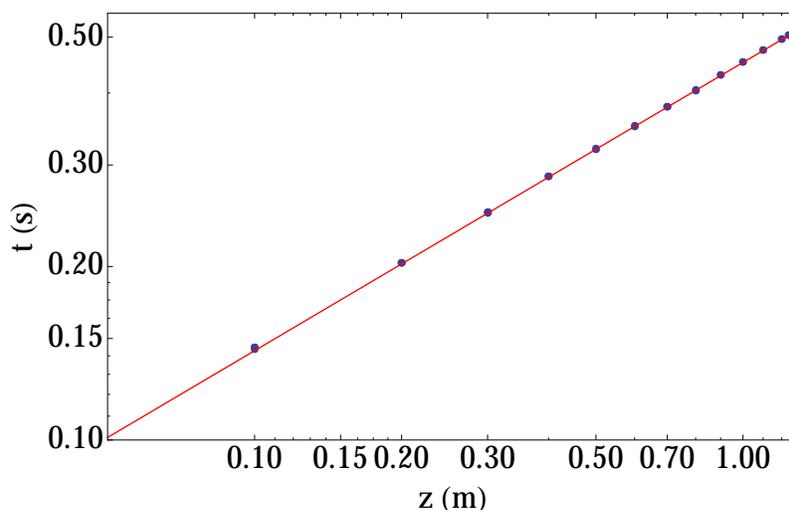


Abbildung 18: Fit an die Messdaten des Experiments zum freien Fall.

Genauigkeit der Parameterabschätzung. Nun interessiert uns noch die Genauigkeit der Abschätzung, die mit der Breite der Posteriorverteilung zusammen hängt. Um diese näherungsweise zu bestimmen entwickeln wir $Q(g)$ in eine Taylorreihe um \hat{g} bis zur zweiten Ordnung (vgl. die parabolische Form der Kurve in Abb. 17). Das ergibt

$$Q(g) \approx Q_{\min} + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 Q(g)}{dg^2} \right|_{\hat{g}} (g - \hat{g})^2 = Q_{\min} + \frac{1}{2} Q''(\hat{g})(g - \hat{g})^2.$$

Die Posteriorverteilung ist damit

$$\text{pdf}(g, \tau | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) \propto \tau^{N/2} \exp \left[-\frac{N\tau}{2} \left(Q_{\min} + \frac{1}{2} Q''(\hat{g})(g - \hat{g})^2 \right) \right].$$

Eine ähnliche Form der Posteriorverteilung hatten wir bereits bei der linearen Regression kennen gelernt. Auch dort [vgl. Gl. (20)] hatte die Posteriorverteilung im Exponenten eine quadratische Form der Parameter. Die Normierungskonstante der Posteriorverteilung kann in dieser genäherten Form berechnet werden, wodurch wir

$$\begin{aligned} \text{pdf}(g, \tau | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) &\approx \frac{N \sqrt{Q_{\min} Q''(\hat{g})}}{2 \sqrt{2\pi} \Gamma((n+1)/2)} \left(\frac{N Q_{\min} \tau}{2} \right)^{N/2} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{N\tau}{2} \left[Q_{\min} + \frac{1}{2} Q''(\hat{g})(g - \hat{g})^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

finden. Dem entsprechend ist die (näherungsweise) marginale Posteriorverteilung für g eine Studentsche t-Verteilung, d.h.,

$$\text{pdf}(g | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \mathcal{T} \left(g; \hat{g}, \sqrt{\frac{2Q_{\min}}{N+1} \frac{1}{Q''(\hat{g})}}, N+1 \right),$$

so dass

$$g = \hat{g} \pm \sqrt{\frac{2Q_{\min}}{N-1} \frac{1}{Q''(\hat{g})}}. \quad (32)$$

Der Schätzwert \hat{g} ist in dieser Näherung gleichzeitig der Mittelwert $\langle g \rangle$ der Erdbeschleunigung. Wir sehen hier auch, dass der Wert Q_{\min} des kleinsten Fehlerquadrats, sowie die zweite Ableitung von $Q(g)$ an der Stelle des Minimums, sowie die Zahl N der Messpunkte die Genauigkeit festlegen, mit der g bestimmt werden kann.

Entsprechend dem Fall der linearen Regression ergibt sich für die marginalisierte Verteilung von τ die Gammaverteilung

$$\text{pdf}(\tau | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \Gamma \left(\tau; \frac{N+1}{2}, \frac{2}{N Q_{\min}} \right),$$

und für die Verteilung von σ^2 die inverse Gammaverteilung

$$\text{pdf}(\sigma^2 | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \text{inv}\Gamma \left(\sigma^2; \frac{N+1}{2}, \frac{N Q_{\min}}{2} \right).$$

Wir geben für σ^2 also das Ergebnis

$$\sigma^2 = \frac{N}{N-1} Q_{\min} \left(1 \pm \sqrt{\frac{2}{N-3}} \right)$$

an.

Graphische Bestimmung der Unsicherheit von g . Mit Hilfe der graphischen Darstellung von $Q(g)$ gelangt man zu einer Abschätzung der Unsicherheit σ_g von g . Aus Gl. (32) finden wir für $\tilde{g} = \hat{g} \pm \sigma_g$

$$Q(\tilde{g}) = Q_{\min} + \frac{1}{2}Q''(\hat{g})(\tilde{g} - \hat{g})^2 = Q_{\min} \left(1 + \frac{1}{N-1}\right).$$

Die beiden Schnittpunkte der horizontalen Geraden $Q_{\min}[1 + 1/(N-1)]$ mit der Kurve $Q(g)$ liegen bei den beiden Werten $\tilde{g} = \hat{g} \pm \sigma_g$ (siehe Abb. 17). Interessanterweise ist der Mittelwert $\langle \sigma^2 \rangle$ gerade durch $Q_{\min}[1 + 1/(N-1)]$ gegeben, also durch den Wert, den wir bereits zur Abschätzung der Genauigkeit von g in Abb. 17 eingetragen haben. Somit lässt sich auch dieser Wert sehr einfach von der graphischen Darstellung von $Q(g)$ ablesen.

Alternativ bietet es sich an, die normierte Funktion

$$\frac{(N-1)\Delta Q}{Q} := \frac{(N-1)[Q(g) - Q_{\min}]}{Q_{\min}} = \frac{N-1}{2Q_{\min}}Q''(\hat{g})(g - \hat{g})^2$$

gegen $g - \hat{g}$ aufzutragen. Die Unsicherheit σ_g ist dann dort abzulesen, wo diese Funktion den Wert eins annimmt, wie es in Abb. 19 dargestellt ist.

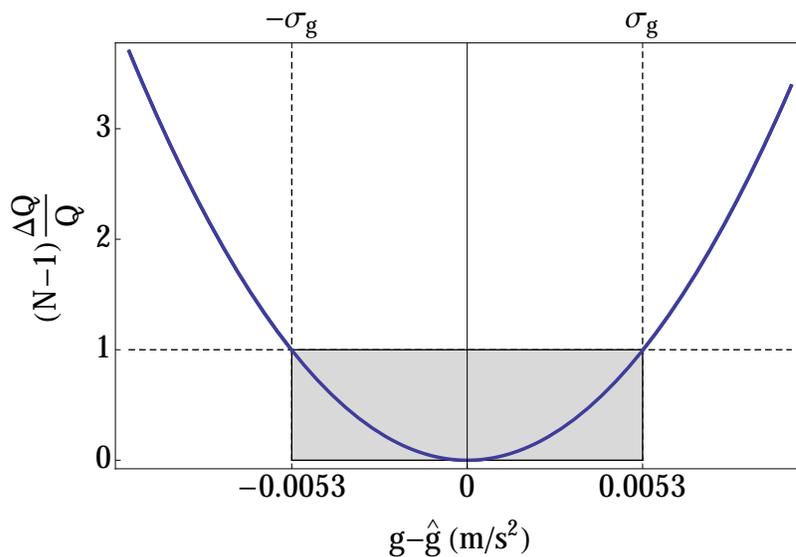


Abbildung 19: Normierte Funktion $(N-1)\Delta Q/Q$ aufgetragen gegen $g - \hat{g}$. Die Unsicherheit σ_g der Parameterschätzung kann direkt aus dem Plot abgelesen werden.

4.3 Inspektion der Residuen des Fits

Keine Fitprozedur ist komplett ohne eine Inspektion der Residuen des Fits. Zu diesem Zweck subtrahiert man die gefittete Funktion von den gemessenen Daten, d.h.

$$r_j = t_j - h(z_j, \hat{g}).$$

Die r_j nennt man die Residuen des Fits. Die Punkte (z_j, r_j) kann man in einem Diagramm auftragen. Dies ist eine Art ‘Selbstkonsistenz-Prüfung’ unseres Modells. Die Residuen r_j entsprechen nämlich den Messfehlern ϵ_j unseres additiven Fehlermodells. Sie sollten daher unkorreliert sein und näherungsweise normalverteilt. Für unser Beispiel sind die Residuen in Abb. 20 dargestellt.

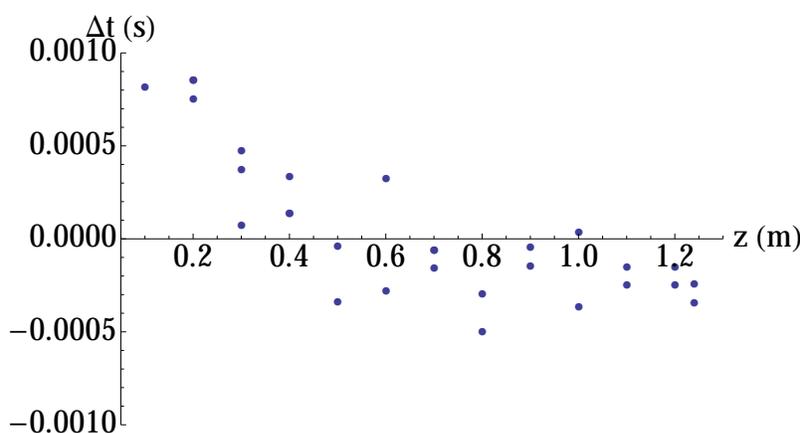


Abbildung 20: Residuen des Fits aus Abb. 18.

Es ist offensichtlich, dass die Residuen nicht unkorreliert sind, sondern dass es für kleine Werte von z einen Trend zu positiven Werten der Residuen gibt. Dieser Befund weist auf einen systematischen Fehler des Modells oder des Experiments hin.

Abbildung 21 zeigt eine Zusammenfassung der Ergebnisse des Fits. Neben dem in Abb. 21(a) gezeigten Fit an die Datenpunkte sehen wir in (b) die Residuen, sowie in (c) ein Histogramm des Residuen. Zusätzlich wurde in (c) noch die Erwartung eingezeichnet, wie die Verteilung der Residuen aussehen sollte, wenn es sich um eine Normalverteilung mit der Breite $\langle \sigma^2 \rangle$ handeln würde. Dieses Histogramm zeigt eine scharfe Kante für negative Werte der r_j und einen breiten Ausläufer für positive Werte. Darin manifestiert sich der systematische Fehler.

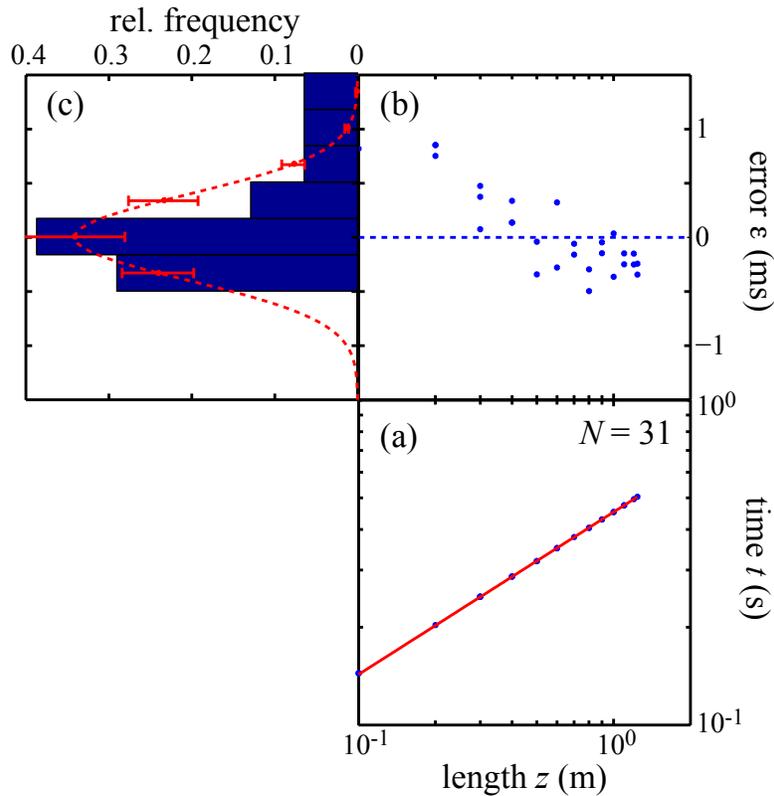


Abbildung 21: Zusammenfassung der Ergebnisse des Fits aus Abb. 18.

4.4 Ein erweitertes physikalisches Modell mit zwei Parametern

Wir erweitern daher das Modell um einen Offset z_0 in der Längenmessung. Die Fitfunktion lautet nun

$$h(z_j, g, z_0) = \sqrt{\frac{2(z_j - z_0)}{g}}.$$

Wir haben damit die Fitkurve von einem auf zwei Parameter erweitert. Das führt zu einer neuen Funktion $Q(g, z_0)$, die den mittleren quadratischen Fehler in der $g - z_0$ Parameter-ebene beschreibt.

Abschätzung der zwei Parameter. Analog zu oben finden wir das Maximum der Posteriorverteilung durch numerisches Minimieren von $Q(g, z_0)$. Dies führt auf Parameterwerte

\hat{g} und \hat{z}_0 , und liefert $Q_{\min} = Q(\hat{g}, \hat{z}_0)$.

Die Funktion $Q(g, z_0)$ lässt sich in der Parameterebene graphisch mit Hilfe von Höhenlinien darstellen, wie es in Abb. 22 gezeigt ist. Wir sehen, dass die Höhenlinien eine elliptische

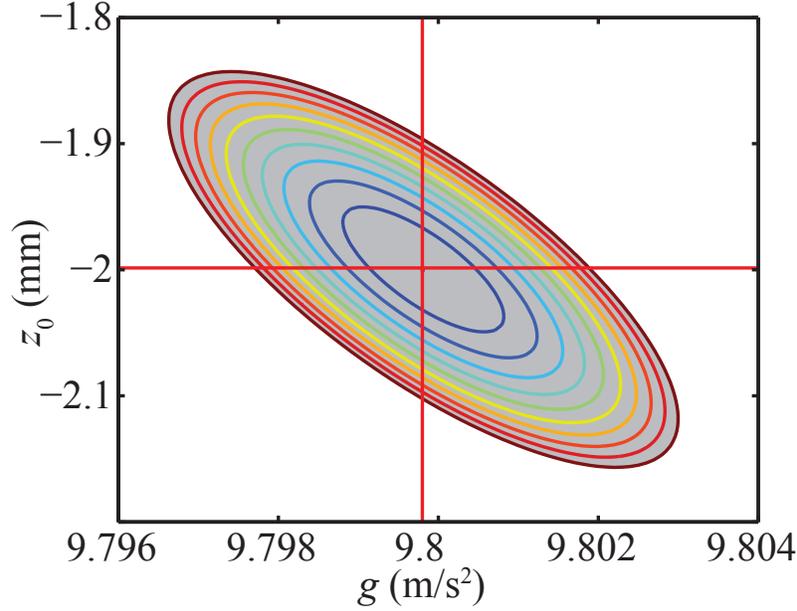


Abbildung 22: Abbildung der Höhenlinien von $Q(g, z_0)$.

Form haben. Am Schnittpunkt der Hauptachsen dieser Ellipsen liegt das Minimum (\hat{g}, \hat{z}_0) .

Abschätzung der Unsicherheiten der Parameter. Wie oben bietet sich daher eine Taylor-Entwicklung von $Q(g, z_0)$ um den Punkt (\hat{g}, \hat{z}_0) in der Parameterebene an. In diesem Fall haben wir

$$Q(g, z_0) \approx Q_{\min} + \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} g - \hat{g} \\ z_0 - \hat{z}_0 \end{pmatrix}}_{:=\vec{P}} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 Q}{\partial g^2} & \frac{\partial^2 Q}{\partial g \partial z_0} \\ \frac{\partial^2 Q}{\partial g \partial z_0} & \frac{\partial^2 Q}{\partial z_0^2} \end{pmatrix}}_{:=H} \begin{pmatrix} g - \hat{g} \\ z_0 - \hat{z}_0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix H heisst Hesse-Matrix der Funktion $Q(g, z_0)$.

Diese Entwicklung der Funktion Q führt wiederum auf eine genäherte Posteriorverteilung, bei der eine quadratische Form im Exponenten steht. Die normierte Verteilung lautet

$$\text{pdf}(g, z_0, \tau | \{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \frac{N \sqrt{\det(H)}}{4\pi \Gamma[N/2]} \left(\frac{NQ_{\min} \tau}{2} \right)^{N/2} \exp \left\{ -\frac{N\tau}{2} \left[Q_{\min} + \frac{1}{2} \vec{P} H \vec{P} \right] \right\}.$$

Die marginalisierte Verteilung für g ist die Student'sche t-Verteilung

$$\text{pdf}(g|\{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \mathcal{T}\left(g; \hat{g}, \sqrt{\frac{2Q_{\min}}{N}(H^{-1})_{1,1}}, N\right),$$

so dass

$$g = \hat{g} \pm \sqrt{\frac{2Q_{\min}}{N-2}(H^{-1})_{1,1}}.$$

Im Vergleich zum Modell ohne Offset z_0 hat hier $(H^{-1})_{1,1}$ die Rolle von $1/Q''(\hat{g})$ übernommen. Zudem hat der zusätzliche Parameter z_0 die Zahl der Freiheitsgrade um eins reduziert.

Entsprechend ist die marginalisierte Verteilungsfunktion für z_0 die Student'sche t-Verteilung

$$\text{pdf}(z_0|\{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \mathcal{T}\left(z_0; \hat{z}_0, \sqrt{\frac{2Q_{\min}}{N}(H^{-1})_{2,2}}, N\right),$$

so dass

$$z_0 = \hat{z}_0 \pm \sqrt{\frac{2Q_{\min}}{N-2}(H^{-1})_{2,2}}.$$

Für den Parameter τ ergibt sich die marginalisierte Verteilung

$$\text{pdf}(\tau|\{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \Gamma\left(\tau; \frac{N}{2}, \frac{2}{NQ_{\min}}\right),$$

und für σ^2 haben wir

$$\text{pdf}(\sigma^2|\{t_j\}, \{z_j\}, M, I) = \text{inv}\Gamma\left(\tau; \frac{N}{2}, \frac{NQ_{\min}}{2}\right),$$

was zur Abschätzung

$$\sigma^2 = \frac{NQ_{\min}}{N-2} \left(1 \pm \sqrt{\frac{2}{N-4}}\right)$$

führt.

Es lässt sich nun, in Übereinstimmung mit den hier angegebenen Ergebnissen allgemein zeigen,³ dass die Unsicherheiten der abgeschätzten Parameter durch die Elemente der inversen Matrix H^{-1} gegeben sind. Diese inverse Matrix lässt sich in unserem zweidimensionalen Fall schreiben als

$$\begin{pmatrix} \sigma_g^2 & \sigma_g \sigma_{z_0} \rho \\ \sigma_g \sigma_{z_0} \rho & \sigma_{z_0}^2 \end{pmatrix} = \frac{2Q_{\min}}{N-2} H^{-1},$$

³z.B. D.S. Sivia, *Data Analysis, A Bayesian Tutorial*, Oxford University Press.

wobei σ_g und σ_{z_0} die gesuchten Unsicherheiten der abgeschätzten Parameter g und z_0 sind. Der Koeffizient ρ heisst linearer Korrelationskoeffizient. Er beschreibt die Korrelation der Parameter g und z_0 , die sich in einer Verkippung der Hauptachsen der Ellipsen in Abb. 22 gegenüber den Koordinatenachsen äussert.

Auch in diesem Fall lassen sich die Werte σ_g , σ_{z_0} und ρ aus der Darstellung der Höhenlinien von $Q(g, z_0)$ in Abb. 22 ablesen. Zweckmässigerweise plottet man dazu die Höhenlinien der normierten Funktion

$$\frac{(N-2)\Delta Q}{Q} := \frac{(N-2)(Q(g, z_0) - Q_{\min})}{Q_{\min}} = \frac{(N-2)}{2Q_{\min}} \vec{P}H\vec{P}.$$

Die Höhenlinie für $(N-2)\Delta Q/Q = k = 1$ ist in Abb. 23 in einer zweidimensionalen Parameterebene in Rot dargestellt. Die Unsicherheiten σ_0 und σ_1 , sowie der Korrelationskoeffizient ρ können, wie in der Abbildung angegeben, abgelesen werden.

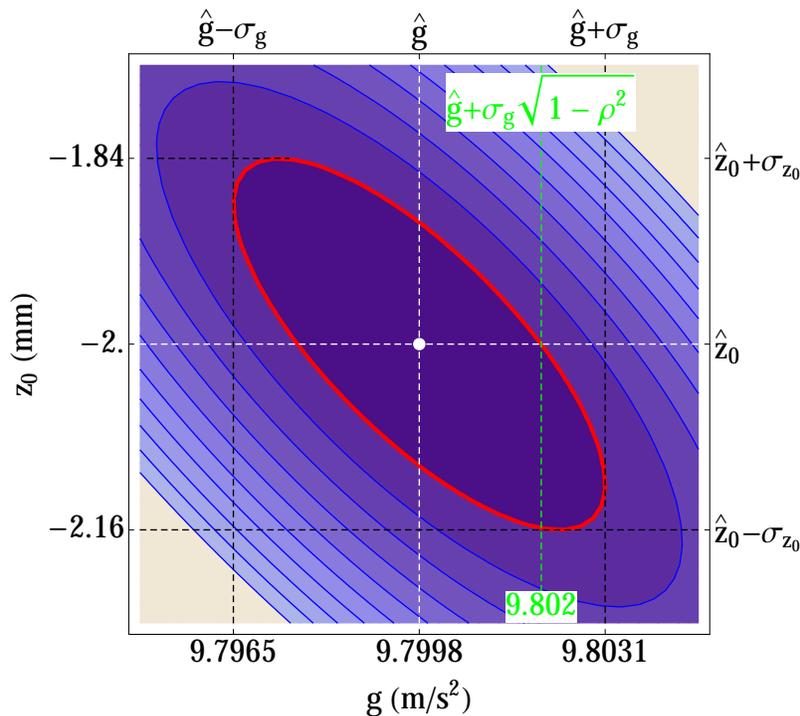


Abbildung 23: Abbildung der Höhenlinie $(N-2)\Delta Q/Q = 1$ (in Rot). Daraus können die Genauigkeiten σ_g und σ_{z_0} der abgeschätzten Parameter \hat{g} und \hat{z}_0 , sowie der Korrelationskoeffizient ρ abgelesen werden.

Inspektion der Residuen des Fits. Auch im Fall unseres erweiterten Modells ist eine genaue Inspektion der Residuen des Fits erforderlich. Eine Zusammenfassung ist in Abb. 24 dargestellt. Insbesondere zeigt Abb. 24(e), dass der Trend in den Residuen im erweiterten Modell verschwunden ist. Auch das Histogramm der Residuen in (f) zeigt eine bessere Übereinstimmung mit der erwarteten Normalverteilung.

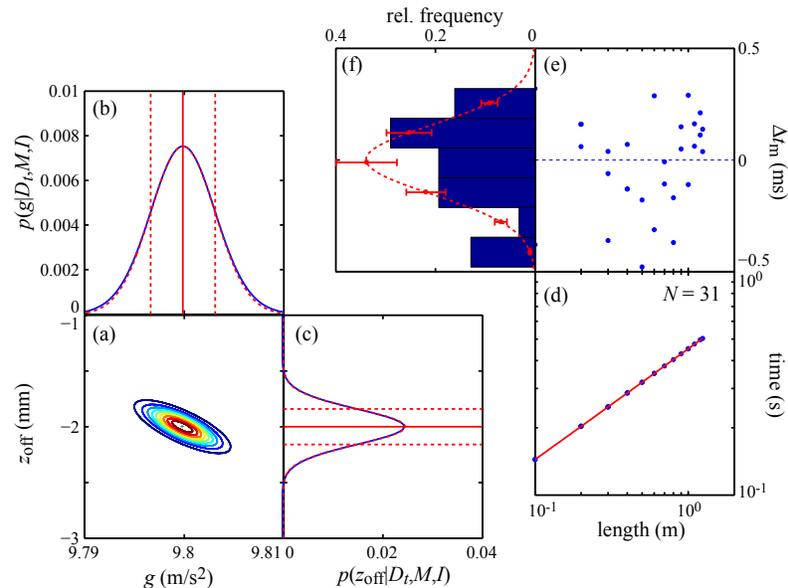


Abbildung 24: Zusammenfassung der Auswertung mit Hilfe des erweiterten Modells. (a) Höhenlinien der Funktion $Q(g, z_0)$. (b) Marginalisierte Posteriorverteilung für g . (c) Marginalisierte Posteriorverteilung für z_0 . (d) Darstellung der Datenpunkte mit der Fitkurve. (e) Residuen des Fits. (f) Histogramm der Residuen des Fits. In Rot ist die erwartete Normalverteilung eingezeichnet.

4.5 Aufgaben und Fragen zum tieferen Verständnis

1. Fertigen Sie eine Liste an, in der Sie alle Annahmen aufnehmen, welche der Methode der kleinsten Fehlerquadrate zugrunde liegt.
2. Überlegen Sie, wie sie bei der Bestimmung der Unsicherheiten der abgeschätzten Parameter vorgehen würden, wenn sich die Funktion $Q(g)$ im relevanten Bereich nicht gut durch eine Parabel nähern liesse.
3. Was beobachten Sie bezüglich der Zahl der Freiheitsgrade der marginalisierten Ver-

teilungen beim Modell mit zwei Parametern im Vergleich zum Modell mit einem Parameter?

4. Begründen Sie die graphische Methode der Bestimmung von σ_g , σ_{z_0} , und ρ für das Modell mit zwei Parametern.